

ИССЛЕДОВАНИЕ И РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ ИЗМЕРЕНИЯ ИЗГИБНОЙ ЖЁСТКОСТИ АКТИНОВЫХ НИТЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ ТРОПОМИОЗИНЫ С МУТАЦИЯМИ

Филиппова М. Е., Аксенов К. А.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
rituly_22@mail.ru, k.a.aksenov@urfu.ru

Аннотация. В данной статье кратко описывается применение подхода, основанного на моделировании, для проектирования и разработки информационной системы автоматизации измерения изгибной жёсткости актиновых нитей, содержащих тропомиозины с мутациями. Исследование данного вопроса является очень важным и актуальным в настоящие дни, однако оно осложнено трудоемким и сложным процессом обработки данных, полученных в результате экспериментов по растяжению актиновых нитей.

В рамках данной работы осуществляется проектирование и разработка автоматизированной системы обработки экспериментальных данных.

Предполагается, что данная система позволит в значительной мере упростить и ускорить данный процесс, а также получить новые аналитические данные.

Ключевые слова: автоматизация, информационная система, проектирование, разработка, тропомиозин, обработка, большие данные, PYTHON

RESEARCH AND DEVELOPMENT OF THE INFORMATION SYSTEM OF AUTOMATION MEASUREMENT OF THE BENDING HARDNESS OF ACTIN THREADS CONTAINING TROPOMYOSINS WITH MUTATIONS

M. Filippova, K Aksyonov

Ural State University, Ekaterinburg, Russia
rituly_22@mail.ru, k.a.aksenov@urfu.ru

Abstract. This article briefly describes the application of a modeling-based approach to the design and development of an information system for automating the

measurement of flexural rigidity of actin filaments containing tropomyosin with mutations. The study of this issue is very important and relevant today, but it is complicated by the time-consuming and complex process of processing the data obtained as a result of experiments on stretching of actin filaments.

As part of this work, the design and development of an automated system for processing experimental data is carried out.

It is assumed that this system will greatly simplify and speed up the process, as well as obtain new analytical data.

Key words: automation, information system, design, development, tropomyosins, processing, big data, PYTHON

Заболевания сердечно-сосудистой системы в настоящие дни являются одними из наиболее распространенных. По статистике, около 0.003% смертей при данных заболеваниях связаны с мутациями в белках сердечно-сосудистого комплекса, в том числе и такого белка, как тропомиозин.

В настоящее время существует определенная информационная база о тропомиозинах с мутациями, связанных с кардиомиопатиями. Тем не менее, имеющихся сведений всё равно недостаточно.

Для изучения влияний мутаций проводятся различные эксперименты по исследованию функциональных характеристик тропомиозина, в том числе и исследования по измерению изгибной жесткости тонкого филамента. Существует ряд методик проведения данных экспериментов. Среди них выделяются прямой и косвенный методы.

Научная группа лаборатории биологической активности института иммунологии и физиологии УрО РАН проводит измерения изгибной жесткости тонкого филамента прямым методом в оптической ловушке.

Такой метод является наиболее точным, но и достаточно сложным, и подразумевает проведение большого числа измерений на специализированной установке, генерирующей большой объем выходных данных. Массив данных необходимо обрабатывать для определения значимых параметров и вычисления изгибной жесткости.

В связи с этим необходимо осуществить проектирование информационной системы автоматизации обработки данных по экспериментам для исследования влияния мутаций тропомиозина на изгибную жесткость тонких филаментов.

Система предназначена для автоматизации процесса измерения изгибной жесткости актиновых нитей, содержащих тропомиозины с мутациями.

Основной целью программы является сокращение чрезмерно широкого стека технологий, а также исключение ручного человеческого труда при заполнении данных и подстановке формул.

В первом приближении прототип системы должен быть подходящим для элементарной автоматизации процесса обработки эксперимента.

В настоящее время обработка выходных данных экспериментов связана с большим количеством однотипных действий с использованием различных программных продуктов, предназначенных для разных этапов обработки и анализа.

Экспериментальная установка генерирует массив сигналов по 8 каналам, который впоследствии конвертируются в excel, где вычисляются значения координат X Y. По первому набору выходных данных происходит калибровка, результаты которой вручную заносятся в excel файлы для дальнейших вычислений.

Также происходит обработка фотографий для вычисления расстояния между шариками.

Фотографии обрезаются по введенным пользователем значениям одной программой, после чего новые файлы необходимо передать следующей программе.

Упрощенно, данный процесс может быть визуализирован в нотации IDEF0 следующим образом (Рис. 1).

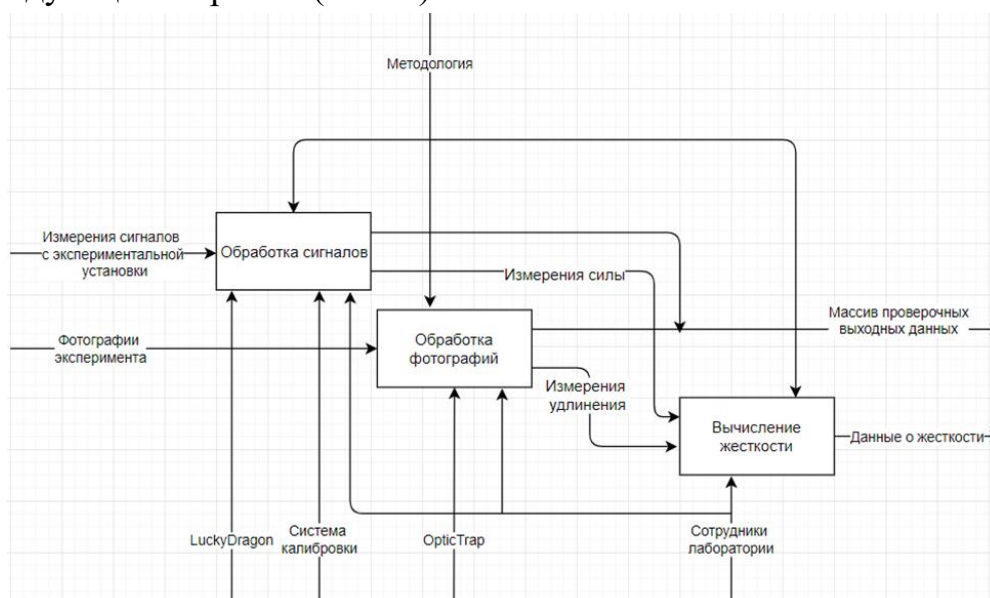


Рисунок 1 – Описание процесса обработки данных экспериментов

В ходе анализа описанных моделей были выявлены узкие места процесса, требующие больших затрат времени и человеческих ресурсов для исполнения

простой зацикленной работы. Это связано с тем, что имеющееся решение состоит из ряда никак не связанных программных решений, многие из которых имеют устаревший или неудобный интерфейс. Кроме того, сотрудникам, занимающимся обработкой, необходимо вручную переносить данные между этими системами.

В связи с этим было принято решение провести автоматизацию данного процесса, так как, рассматриваемый комплекс обработки результатов измерений прямым методом не имеет аналогов в мире, и является достаточно узконаправленным процессом.

В таком случае, автоматизация процесса может быть достигнута лишь путем проектирования и разработки информационной системы, объединяющей в своей реализации функционал и возможности всех отдельных программных продуктов существующего решения.

При этом необходимо избегать его недостатков, частично изменяя внутреннюю реализацию и исключая ручной труд сотрудников настолько, насколько это возможно.

Для этого была спроектирована и описана архитектура предлагаемого решения, а также определены требования к данной системе. Данная диаграмма последовательности это демонстрирует (Рис. 2).

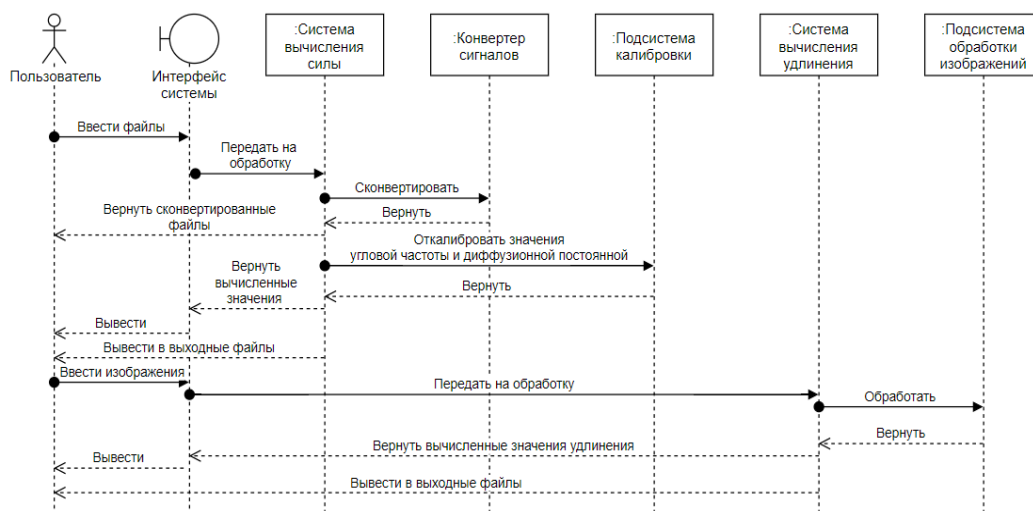


Рисунок 2 – Диаграмма последовательности предлагаемого решения

В рамках данной работы были также определены требования к данной системе и разработаны прототипы автоматизированных компонентов системы обработки экспериментальных данных. Исходя из них был осуществлён выбор средств разработки. В качестве языка программирования выбран python версии 3.7, так как он наиболее полно соответствует поставленным требованиям.

В ходе работы был также разработан работоспособный прототип проектируемой системы. Однако, в настоящее время реализованы лишь отдельные компоненты единой системы с отдельными интерфейсами (Рис. 3).

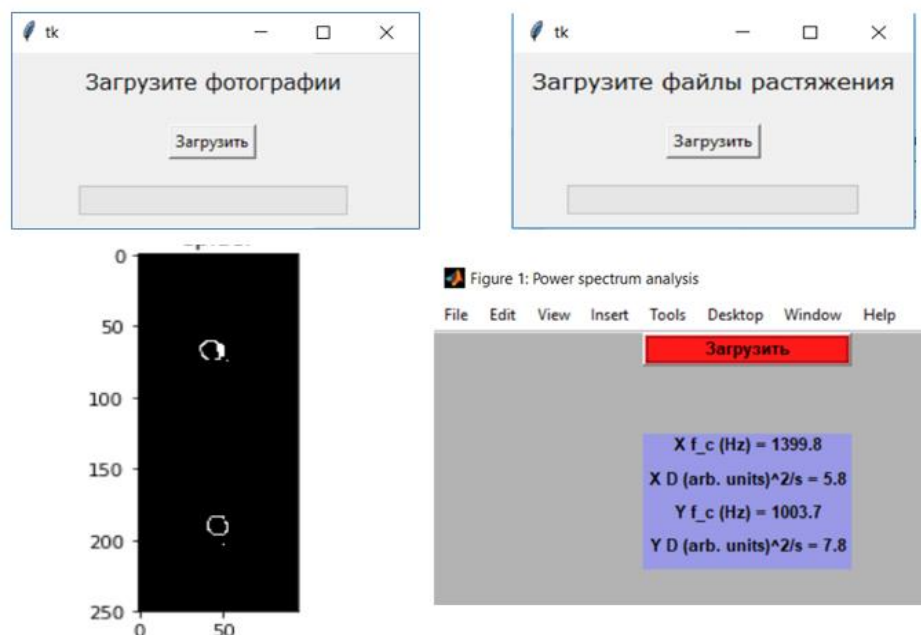


Рисунок 3 – Примеры интерфейсов предлагаемого решения

Тем не менее, стоит отметить, что каждый модуль является законченным решением, которое уже в настоящее время применено на практике.

Основным достижением является почти полное исключение или значительное сокращение человеческого труда в ходе обработки результатов экспериментов.

В дальнейшем работа будет продолжена. Следующим шагом планируется объединение всех разработанных модулей автоматизации в единый комплекс с общим максимально простым пользовательским интерфейсом.

Предлагаемое решение в значительной мере поможет продвинуться в изучении вопроса влияния мутаций тропомиозина на значение изгибной жесткости.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Dupuis D.E., Guilford W.H., Warshaw D.M. Actin filament mechanics in the laser trap // J. Muscle Res. Cell Motil. – 1997. – №18. – P. 17–30.
2. Kopylova G.V., Nabiev S.R., Filippova M.E., Nikitina L.V., Shchepkin D.V., Bershitsky S.Y. Comparison of Ca^{2+} -regulation of acto-myosin interaction in atrial and ventricle myocardium // International Symposium "Biological Motility" / Pushchino. – 2016. – P. 103-106.

3. Nabiev S., Nikitina L., Filippova M., Alimpieva O., Kopylova G., Shchepkin D., Matyushenko A. Study of the effect of cardiomyopathic mutations of Tpm on the bending stiffness of thin filaments using the optical trap // *Journal of Muscle Research and Cell Motility*. – 2017. – P. 371.
4. Redwood C, Robinson P. Alpha-tropomyosin mutations in inherited cardiomyopathies. // *Journal of Muscle Research and Cell Motility*. – 2013. – №34.
5. Аксенов К.А., Спицина И.А., Черникова К.О., Гончарова Н.В. Проектирование интерфейсов АСОИУ: учебное издание. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2007. – 127 с.
6. Гусев Н.Б. Молекулярные механизмы мышечного сокращения // (2000) // *Соросовский образовательный журнал*. – 2000. – Т.6. – № 8. – С. 24-32.
7. Набиев С.Р., Овсянников Д.А., Бершицкий Б.Ю., Бершицкий С.Ю. Оптическая ловушка как инструмент для исследования моторных белков // *Биофизика*. – 2008. – № 53. – С. 929-935.
8. Невзоров И. А., Левицкий Д И. Тропомиозин: двойная спираль из мира белков // *Успехи биологической химии*. – 2011 – Т. 51. – С. 283-334
9. Никитина Л.В., Копылова Г.В., Щепкин Д.В., Набиев С.Р., Бершицкий С.Ю. Исследование молекулярных механизмов актин-миозинового взаимодействия в сердечной мышце // *Успехи биологической химии*. – 2015. – № 55. – С. 255-288.
10. Спицина И.А., Аксенов К.А. Мультиагентный метод анализа и синтеза информационных систем – Екатеринбург: УрФУ. – 2017.
11. Филиппова М.Е., Набиев С.Р., Никитина Л.В., Матюшенко А.М., Копылова Г.В., Щепкин Д.В., Бершицкий С.Ю. Влияние кардиомиопатических мутаций тропомиозина на изгибную жесткость тонких филаментов // *Биология - наука XXI века: 21-я Международная Пущинская школа-конференция молодых ученых / Пущино*. – 2017. – С. 208.